专题：新材料科学发展战略思考与创新实践
Advanced Materials Science Development Strategy and Innovative Practice

编者按　新材料产业是战略性、基础性产业，也是高技术竞争的关键领域。当前，新材料供给水平不强是半导体等产业发展的突出短板，也是制约我国新能源等产业抢占未来产业制高点的关键所在，加快新材料创新发展对于保障我国产业链和供应链安全具有重要现实意义，对构建“双循环”新发展格局具有重要战略意义。为探讨我国新材料创新发展的路径，《中国科学院院刊》特组织策划了“新材料发展战略思考与创新实践”专题，从我国新材料产业集群发展战略、重点新材料领域科技发展趋势及创新实践等角度提供了“管窥之见”。本专题由《中国科学院院刊》编委、中国科学院物理研究所研究员、松山湖材料实验室主任汪卫华院士指导推进。

引用格式：林伟坚, 张博文, 汪卫华. 从全球气候变化、制造业产业升级、国家安全及材料基因工程维度探讨材料科学发展趋势. 中国科学院院刊, 2022, 37(3): 336-342.
Lin W J, Zhang B W, Wang W H. Discussion of materials science development trend through climate change, manufacturing update, national security and materials genome initiative. Bulletin of Chinese Academy of Sciences, 2022, 37(3): 336-342. (in Chinese)

从全球气候变化、制造业产业升级、国家安全及材料基因工程维度探讨材料科学发展趋势

林伟坚[1,2]　张博文[1]　汪卫华[1,2*]
1 松山湖材料实验室 东莞 523808
2 中国科学院物理研究所 北京 100190

摘要　新材料被视为新技术革命的基础和先导，新材料的发展及趋势将深刻影响时代的变化、人类生活和社会发展。当今全球气候变化带来的风险日趋紧迫，新一轮技术革命带来的制造业升级压力空前巨大，世界政治格局发生深刻变化，国家间的竞争与摩擦愈演愈烈，关键材料的快速迭代正日渐成为主流，新材料研发模式本身也亟待变革。文章通过大量调研和梳理，从全球气候变化、制造业产业升级、国家安全及材料基因工程4个维度分析与预测材料科学和技术的发展趋势。

关键词　材料科学，材料基因工程，发展趋势

DOI　10.16418/j.issn.1000-3045.20211208004

当今世界正经历百年未有之大变局，各类技术、理念和产业都发生着日新月异的变化。材料是现代文明的三大支柱之一，新材料被视为新技术革命的基础和先导，其发展和趋势将深刻影响时代的变化。近年来，全球气候变化造成的影响已经涉及人类生活的方方面面，环境保护日益成为各国发展战略的核心议题，我国也将生态文明建设作为“五位一体”总体布局的重要组成部分。同时，新一轮技术革命正在如火

*通信作者
修改稿收到日期：2022年3月1日

如荼地进行当中，随着制造技术高速迭代，全球制造业均面临着巨大的升级压力，多个主要制造业国家提出了工业升级战略，产业博弈进入新时代。此外，国家安全始终是各个国家发展的核心战略，在总体国家安全观下国家安全战略也有了更丰富的内涵，面临着巨大的发展机遇，具有重大意义。材料科学发展在应对全球气候变化、制造业产业升级、国家安全等方面发挥不可替代的关键作用。现有的材料研发速度已经难以满足社会的发展需求，材料科学的研发方式本身也必须要做出变革，因此材料基因工程理念和方法应运而生。本文从全球气候变化、制造业产业升级、国家安全、材料基因工程 4 个方面，对材料科学发展的趋势进行研判和预测。

1 全球气候变化背景下的材料科学发展

能源清洁、低碳化趋势已经成为全球共识。《中华人民共和国国民经济和社会发展第十四个五年规划和 2035 年远景目标纲要》中将“持续改善环境质量”单独成章，进行规划与布局。2021 年《中美应对气候危机联合声明》[1]再次强调了气候变化带来的风险的紧迫性。在环境保护重要性和紧迫性[2]双重要求下，材料科学需要通过支撑新能源材料推广、废弃物回收和高污染产业替代 3 个方面发挥作用。

（1）*新能源材料*。发展环境友好的新能源材料，其实质是通过环境友好的方式完成能量捕获、能量存储和能量使用过程。例如：① *高性能永磁体材料和具有高光电转化效率的光伏材料等*。这些高性能发电材料能够拓展人类从自然界捕获能量的渠道和效率，光伏技术是发展速度最快的清洁能源技术，能够满足未来太瓦级的能源需求。② *太阳能电池技术*。晶硅电池是成熟度最高的太阳能电池技术，兼具高效、稳定、安全等技术特点，近年来生产成本大幅下降，市场占有率达 90%。此外，金属卤化物钙钛矿太阳能电池在过去 10 年内取得了举世瞩目的发展。截至目前，小面积钙钛矿电池的认证效率达到 25.5%；钙钛矿/硅叠层电池的认证效率已达到 29.5%，其成为全球公认最具前景的新一代光伏器件。研发高效率、低成本、稳定、安全的太阳能电池是实现太阳能光伏发电广泛应用的技术基础。捕获的能量可直接并网使用或储存在各类储能材料（如二次电池、超级电容器、储氢材料）中。③ *电化学储能技术*。近年来，电化学储能技术席卷消费类电子市场，并迅速进入交通等领域。锂离子电池能量密度高、电压高、成本低，是该类技术的代表；得益于电动汽车产业的迅速发展，水系锌基电池等新型储能电池研发工作近年来取得快速发展。此外，可再生能源的氢转化与存储技术是我国大力发展的技术路线。开发高容量电极材料、高活性催化剂，进一步提升电池稳定性、安全性，降低成本是储能领域的核心。在此基础上，通过广泛使用低电阻、低铁损的非晶变压器、非晶电机和软磁材料等节能材料，可进一步提升能量利用率，降低碳排放。

（2）*废弃物回收*。我国作为全球制造业第一大国，在工业生产过程中所产生的大量废气、废水和固态废弃物需要在减量化、资源化、无害化的原则下进行处理。*从减量化角度来看*，通过耐腐蚀、耐疲劳、耐磨损材料的开发，尽可能延长各类工业产品的使用寿命，从而减少单位时间内产出的废弃物。*从无害化角度看*，利用各类催化材料的光催化或化学催化等方法，辅以金属有机骨架化合物（MOFs）和共价有机骨架化合物（COFs）材料的超高比表面积，实现对废气和废水的高效降解或无害化处理。*从资源化角度看*，需要积极开展废弃物资源化研究。2019 年我国一般工业固废综合利用量占比为 55.9%①，仍有较大的上

① 中华人民共和国生态环境部. 2020 年全国大、中城市固体废物污染环境防治年报. (2020-12-28). https://www.mee.gov.cn/ywgz/gtfwyhxpgl/gtfw/202012/P020201228557295103367.pdf.

升空间。城市和农村基础设施的建设和替换也会产生大量的建筑业废弃物。充分利用工业废氢、废钢、钢渣、高炉渣、赤泥、煤矸石、尾矿、电石渣和粉煤灰等废弃物，提升综合利用率，可以变废为宝。对航空工业、电子工业和汽车工业因产品升级导致的废弃产品，如芯片、电池和电子产品，也需开展回收再利用的尝试和研究，以期形成行业内部关键资源自循环，减少外部资源重复投入。

（3）高污染替代。对现有材料生产方式进行改进，替代高污染、高耗能的生产方式，简化生产工艺，也是材料科学可以发挥作用的一大领域。例如，金属材料生产中采用连铸连轧、挤压铸造等近终形制造工艺，提升材料综合利用率，减少重复加热导致的能量消耗；在非晶粉末生产中采用甩带破碎工艺，简化非晶粉末生产过程中的破碎步骤，提升生产效率，可大幅降低生产能耗。

2 制造业产业升级背景下的材料科学发展

全球正处于在新的产业革命时代，正经历着百年未有之大变局。着力提升国家制造业基础是提升综合国力的重要支点，是“以不变应万变”的主要抓手。世界各国也因此纷纷启动了推进制造业发展的相关计划。例如，德国推进“工业 4.0”战略[3]，美国尝试工业互联网和“创客”，日本也推出了新的经济增长战略以应对“第 4 次产业革命”②。我国是全球制造业第一大国，也是唯一拥有完整产业链的国家，全球制造业发展与我国发展息息相关③。材料科学是制造业发展与进步的关键基础，也是公认的制造业发展的瓶颈。因此，在制造业产业升级背景下，材料科学发展应从完成制造业产业升级和促进制造业结构改革两个方面发挥作用。

（1）制造业产业升级。“一代材料一代产业”，各类产业升级离不开材料科学的进步。“提升产量、提升质量、提升效率、降低成本”的“三提一降”策略是贯穿制造业发展始终的产业核心战略。材料科学、新材料和相关技术能够帮助产业实现升级。例如，通过突破镍锰酸锂正极材料及电池有关技术，将目前占主流的动力和储能用磷酸铁锂电池体系替换为镍锰酸锂体系，电池能量密度将提升 40% 以上，每千瓦时成本可降低 20% 以上；或通过突破低密度钢、高性能车用钢的有关技术，替换现有钢材，在不提升其生产成本的前提下，提升其服役性能。

（2）制造业结构改革。除了在现有产业角度不断提升之外，材料科学还应发挥基础科学的创新源头作用，改变我国材料工业和制造业现有的“大而不强”局面。逐步推动增材制造、先进熔炼和精密制造等材料相关的高端制造行业扩大产业规模，提升市场占比，形成从原材料到产品的完整产业链。

3 基于国家安全的材料科学发展

2014 年，习近平总书记在中央国家安全委员会第一次全体会议上，提出了“总体国家安全观”重大战略思想[4,5]。国家安全是国民经济和民生稳步发展的重要前提。材料科学的发展与国防安全、社会安全和科技安全密切相关。在《中华人民共和国国民经济和社会发展第十四个五年规划和 2035 年远景目标纲要》中也提出要深入实施制造强国战略，坚持自主可控、安全高效，保持制造业比重基本稳定，推动制造业高质量发展。这是实现国家产业安全的重要布局，也是保障社会安全的关键屏障。材料科学在核聚变反应堆材料、高能激光材料、先进通讯材料和航天材料等关键领域的持续发展是保障国家科技安全的重要抓

② 中国新闻网．日本推出新经济增长战略力推“第 4 次产业革命”. (2016-06-03). https://www.chinanews.com.cn/gj/2016/06-03/7893442.shtml.

③人民日报海外版．第四次工业革命的中国机遇 . (2017-05-30). http://finance.people.com.cn/n1/2017/0530/c1004-29307311.html.

手之一。

（1）关键国防安全材料。关键国防安全材料除了包括军用金属材料、军用陶瓷材料、军用高分子材料和军用复合材料等常规军用材料外，还包括为满足战略轰炸机、新一代陆基作战平台、电磁轨道炮、高超声速飞行器和新型无人作战系统等新军事战略需求需要着力研发的新型军用材料。需要开展包括隐身材料、超材料、高性能热障材料、新型发动机材料、轻质合金材料、高性能纤维材料、含能材料、磁性材料和新型光电功能材料等诸多材料体系的关键技术攻关。例如：轻质合金除了需要攻关新型高性能镁合金、铝合金和钛合金的成分设计，对于这些合金的冷热成型性能和与异质合金的连接性能也需要着力攻关；高性能纤维材料除了要攻关碳纤维、芳纶纤维、聚酰亚胺纤维和超高分子量聚乙烯纤维等材料的生产工艺外，还需要解决与其配套的环氧树脂、聚氨酯、乙烯-乙酸乙烯酯共聚物（EVA）等纤维增强复合材料基体材料的迭代研制，以解决国产高性能纤维应用困境。积极发展军民共用特种新材料，加快技术双向转移转化，促进新材料产业军民融合发展。

（2）关键产业安全材料。关键产业安全材料主要包括核心基础零部件、先进基础工艺和关键基础材料，确保在航天装备、通信装备、发电与输变电设备、工程机械、轨道交通装备、家用电器等与国计民生密切相关的产业中的相关材料关键技术能够拥有相对完整的自主知识产权，相关的关键科学问题能够自主开展攻关。确保在全球格局发生深刻变革的过程中，国家的基础工业、基本民生和关键领域能够保持稳定并可以自主发展。国家应该以特种金属功能材料、高性能结构材料、功能性高分子材料、特种无机非金属材料和先进复合材料为发展重点，加快研发先进熔炼、凝固成型、气相沉积、型材加工、高效合成等新材料制备关键技术和装备，加强基础研究和体系建设，突破产业化制备瓶颈。

（3）关键技术安全材料。在世界百年未有之大变局中，我国还需要在核聚变反应堆材料、高能激光材料、先进通讯材料及航天材料等处于材料科学技术前沿开展研究。需要高度关注颠覆性新材料对传统材料的影响，做好超导材料、纳米材料、石墨烯、生物基材料等战略前沿材料提前布局和研制，加快基础材料升级换代。

4 材料基因工程对材料研发的影响

新材料的发现往往是一个偶然的过程，研发周期长、投入大。人们一直梦想可以面向实际需求进行材料设计，实现从依赖于经验的传统“炒菜式”试错型摸索向有理论依据的、可计算预测的科学设计转变。但是材料的组分-结构-性能之间的关系不是线性的，而是复杂多变的，人们直接面对的挑战就是如何面对众多的已知信息探索这些关系模式。目前，还没有一种理论或实验能够全面、准确获取所有的必需信息。

材料基因工程是材料研发的最新理念，将从根本上改变材料科学领域的研发模式，是材料科学领域的一场革命。材料基因工程基本理念在于通过高通量自动流程计算，探索物质或材料最底层要素及其协同调控物性的机制或规律，进行高通量集成计算与多层次材料设计，开展高通量材料组合设计实验，以及基于高通量计算与实验构建材料设计数据库及信息数据库。材料基因工程目标在于变革材料研发模式，实现按需设计，快速低耗创新发展新材料。材料基因工程的发展需要从高通量制备表征方法、高通量仿真计算方法和人工智能赋能3个方面开展工作。

4.1 高通量制备表征方法

高通量制备技术与材料的计算、预测环节紧密衔接，目前尚处于尝试发展阶段，如：组合薄膜沉积、多元扩散、喷印合成、微反应器阵列、激光增材等技术。一方面需要不断发展和完善各类制备手段；另一

方面需要强大的技术支撑给具体材料“量体裁衣”，针对具体制备环节设计新方法。相较于传统的单个样品“试错法”而言，高通量合成技术能够（连续）调控某个生长变量，如生长温度、气氛、压力等参数，实现系列样品的平行制备，因而更加适合多元材料新体系的探索和研究。在过去20年中，以“组合材料芯片”技术为代表的低维度材料高通量合成与表征平台技术在先进功能材料的研发中不断涌现新的案例；同时，多元扩散、喷印合成、微反应器阵列、激光增材等技术亦逐渐被应用于各类新材料探索中。

快速表征手段包括微区集成、连续扫描、多功能叠加、响应灵敏度等。目前，高通量合成材料制备缺乏丰富的快速表征手段和商业化设备，这成为制约材料基因计划推广的瓶颈。解决这一问题，一方面要结合大科学装置实现高通量合成材料制备的微区结构、成分，以及电子、自旋、晶格等谱学探测手段；另一方面，要针对电磁学、热力学、电化学、力学、催化等材料性能，积极建设相应微区探测手段，以实现不同形态、性能材料的快速筛选。

4.2 高通量仿真计算方法

为实现高效率的材料设计，材料基因工程注重发展和采用高通量仿真计算与实验技术，同时需保证材料设计、实验、应用环节的一体化进程。其中，高通量仿真计算是指直接面向应用需求，以原子为基本单元，基于量子力学的基本原理，充分利用已有或已知的材料结构 / 组分及物性等基本知识，有机结合大数据等信息化技术手段，自动进行智能化的材料设计与调控、物性计算与模拟；因此，能够在短时间内进行大量材料的筛选与优化，为实验合成制备提供理论指导，从而加速新材料发现、优化和应用的过程。高通量仿真计算旨在探求材料结构 / 组分和物性之间的关联，建立起材料基因组数据库。

高通量仿真计算改变了材料研究人员一次只能研究单个或少数材料的单兵作战模式。他们只需提出材料性能需求，监控和调整材料搜索、设计、计算方案，分析计算结果，高通量仿真计算工具会依据需求和材料数据库，自动生成大量相关材料计算任务，进行全方位的扫描和过滤，从而极大拓宽研究对象范围，提高新材料发现几率。高通量材料计算可以在实验开展之前进行筛选和优化，可以在实验无法达到的极端条件（如高温、高压、强场、超快、辐射等）下进行材料性能预测，以及对实验现象的微观机理进行探索和验证，从而节约实验成本和缩短实验周期，是实现材料基因工程总体目标的关键。

4.3 人工智能赋能

通过数据科学技术，深度挖掘高通量实验和高通量仿真计算数据信息，开创材料计算大数据科学方法。融合材料科学和信息科学的先进性，通过海量数据存储、人工智能数据挖掘预测、互联网信息共享传播等技术手段，将材料研发推进到大数据时代。通过人工智能方法，提取材料“结构-物性”之间的隐形联系，形成材料筛选和预测机制。通过海量数据构建可精确预测材料组分、结构、物性、合成条件的人工智能模型，并外推至更加广阔的相空间，高效的筛选和预测新材料，加速材料研发。

需要针对亟待解决材料科研和工业应用领域中的材料科学难题，展开针对性研发。例如，针对新型无机功能材料、催化剂及电池材料、具有宏观量子特性的新型材料、高性能轻质合金材料等领域的攻坚，有望进一步推进我国的材料工程水准，提高制造业核心生产力。

材料发展历程是人类社会文明进步的标志，其作用远不止以上讨论的几个方向。新材料的研发与应用反映一个国家的科技竞争能力，先进材料是我国制造业强国战略的物质基础，材料基因工程计划也是国家战略计划和科技部署中的重要部分。材料科学的发展既要着眼于未来，又需解决当前国家重大需求的现

实问题；既需要建立快速、低耗、创新发展的科学基础，又必须解决我国高端制造业所需关键材料长期依靠进口的严峻状态。

参考文献

1 人民日报. 中美应对气候危机联合声明. 人民日报, 2021-04-19(03).
People's Daily. China-U.S. Joint Statement Addressing the Climate Crisis. People's Daily. 2021-04-19(03). (in Chinese)

2 李秉新, 殷淼. 175个国家签署气候变化《巴黎协定》. 人民日报, 2016-04-24(02)
Li B X, Yin M. 175 States Sign Paris Agreement. People's Daily, 2016-04-24(02). (in Chinese)

3 冯雪珺. "工业4.0"提升德国制造专业性. 人民日报, 2016-02-23(22).
Feng X J. Industry 4.0 make the manufacturing of Germany more professional. People's Daily, 2016-02-23(22). (in Chinese)

4 高祖贵. 深刻理解和把握总体国家安全观. 人民日报, 2020-04-15(09).
Gao Z G. Deeply understand and control the holistic view of national security. People's Daily, 2020-04-15(09). (in Chinese)

5 中共中央党史和文献研究院. 习近平关于总体国家安全观论述摘编. 北京: 中央文献出版社, 2018.
Institute of party history and literature of the CPC Central Committee. The Extract and Compile Discussion of the Holistic View of National Security by Xi Jinping. Beijing: Central Party Literature Publisher, 2018. (in Chinese)

Discussion of Materials Science Development Trend Through Climate Change, Manufacturing Update, National Security and Materials Genome Initiative

LIN Weijian[1,2] ZHANG Bowen[1] WANG Weihua[1,2*]

(1 Songshan Lake Materials Laboratory, Dongguan 523808, China;

2 Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

Abstract New materials are considered as the foreguide and the base of the revolution of advanced technology. Its development and trend of new materials greatly influences the human life and society development. Nowadays, the risk of climate change is increasing day by day, the pressure of manufacturing update of new technology revolution is bigger than ever, the competition and the friction between countries become more and more intense, and the iteration of advanced materials turns to a rigid demand. In this work, we analyze and predict the development tread of material from the aspects of climate change, manufacturing update, national security, and materials genome initiative.

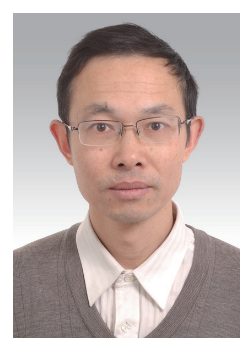
Keywords materials science, materials genome initiative, development trend

*Corresponding author



林伟坚　广东省松山湖材料实验室科研部部长。主要研究领域：凝聚态物理学，新型阻变存储材料和机理研究。广东省前沿新材料产业集群战略咨询专家。参与多项国家及省市课题。E-mail: linwj@sslab.org.cn

LIN Weijian　Director of Research Project Management Department of Songshan Lake Materials Laboratory, Strategic Consulting Expert of Cutting-edge Materials Industry Colony in Guangdong Province. His research focuses on condensed matter physics. He has involved in a number of national or provincial research projects. E-mail: linwj@sslab.org.cn



汪卫华　中国科学院院士，发展中国家科学院院士。广东省松山湖材料实验室主任，中国科学院物理研究所研究员，中国科学院极端条件物理重点实验室主任。主要研究领域：非晶合金材料、非晶态物理等。主持中国科学院、科学技术部、国家自然科学基金委员会等单位的10多项重大课题，参与多项国家科技发展的咨询与评估工作。E-mail: whw@iphy.ca.cn

WANG Weihua　Academician of Chinese Academy of Sciences (CAS), Fellow of the World Academy of Sciences for the advancement of science in developing countries (TWAS). Director of Songshan Lake Materials Laboratory of Guangdong Province, Director of Key Laboratory of Extreme Conditions Physics of Chinese Academy of Sciences (CAS), and Professor of Institutes of Physics, CAS. Dr. Wang's research focuses on science & technology of amorphous matter, applications of metallic glass materials, etc. In recent years, he has presided more than 10 major projects of CAS, Ministry of Science and Technology, National Natural Science Foundation of China, and so on. He has also been involved in the consultation and evaluation of a number of national science and technology development projects.
E-mail: whw@iphy.ca.cn

■责任编辑：张帆